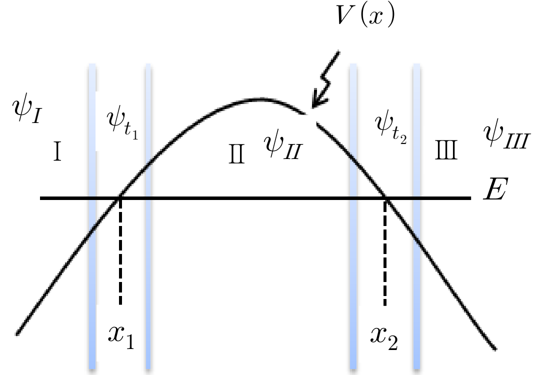
6.4 장벽 투과 (Transmission through a potential barrier)



이제 위치에너지 장벽의 투과에 WKB 어림을 사용하는 방법을 생각해 보자. 옆의 그림에서처럼 영역을 운동에너지가 양인 부분과 음인 부분의 3 영역으로 나누어 각각 I, II, III 으로 표시하자. 입자가 $-x$ 의 방향에서 입사하였다면, 먼저 영역 I 에서는 WKB 어림에 의하여 다음과 같이 파동함수를 표현할 수 있을 것이다.

$$\psi_{\mathrm{I}} \sim \frac{1}{\sqrt{k}}\left[A\, e^{i\int_x^{x_1} k(x)dx} + B e^{-i\int_x^{x_1} k(x)dx}\right]$$

영역 II 의 경우에는 두 되돌이점 근처에서의 파동함수인 ψ_{t1} 및 ψ_{t2} 와 같아져야 하므로 비교의 편의를 위하여 x_1 및 x_2 근처에서의 파동함수를 각각 ψ_{II}^- 및 ψ_{II}^+ 로 표현하자.

$$\psi_{\mathrm{II}}^- \sim \frac{1}{\sqrt{\kappa}}\left[C e^{\int_{x_1}^{x} \kappa dx} + D e^{-\int_{x_1}^{x} \kappa dx}\right]\ ,\ \psi_{\mathrm{II}}^+ \sim \frac{1}{\sqrt{\kappa}}\left[C^{'}\, e^{\int_x^{x_2} \kappa dx} + D^{'} e^{-\int_x^{x_2} \kappa dx}\right]$$

끝으로 영역 III 에서는 투과된 파동함수만 존재할 것이므로 우리는 다음과 같이 쓸 수 있을 것이다.

$$\psi_{\mathrm{III}} \sim \frac{1}{\sqrt{k}} F\, e^{i\int_{x_2}^{x} k(x)dx}$$

여기서 한 가지 언급할 점은 영역 II에서는 실제 하나의 파동함수로 표현되어야 하므로, ψ_{II}^- 와 ψ_{II}^+ 가 서로 연관되어 있다는 점이다.

즉, $\int_{x_1}^{x} \kappa\, dx = \int_{x_1}^{x_2} \kappa\, dx - \int_{x}^{x_2} \kappa\, dx$ 으로 표현되므로, $\int_{x_1}^{x_2} \kappa\, dx \equiv K$ 로 놓으면 ψ_{II}^- 는

$$\psi_{\mathrm{II}}^- \sim \frac{1}{\sqrt{\kappa}}\left[C\, e^{\int_{x_1}^{x} \kappa dx} + D\, e^{-\int_{x_1}^{x} \kappa dx}\right] = \frac{1}{\sqrt{\kappa}}\left[e^{K} C\, e^{-\int_x^{x_2} \kappa dx} + e^{-K} D\, e^{\int_x^{x_2} \kappa dx}\right]$$

로 표현되는데, 이 표현은 ψ_{II}^+ 와 같아야 되므로, $D^{'} = e^{K} C,\ C^{'} = e^{-K} D$ 의 관계가 성립함을 알 수 있다.

이제 각 되돌이점 근처에서의 파동함수와 되돌이점에서 떨어진 WKB 파동함수들과의 연결을 생각해보자. 먼저 가장 간단하게 주어진 영역 III 에서의 파동함수 ψ_{III} 와 되돌이점 x_2 근처에서 구한 파동함수 ψ_{t_2} 의 연결을 생각하자.

되돌이점 x_2 에서 위치에너지 함수의 접선의 기울기를 $-c_2$ $(c_2 > 0)$ 라고 하면, 이 부근에서의 위치에너지는 $V \simeq -c_2(x - x_2) + E$ 로 쓸 수 있으므로 슈뢰딩거 방정식은 앞에서 본 것처럼 에어리의 방정식으로 주어진다.

$$\frac{d^2\psi_{t_2}}{dy^2} - y\,\psi_{t_2} = 0\,, \qquad y \equiv -(\frac{2m}{\hbar^2}c_2)^{\frac{1}{3}}(x-x_2)$$

그러므로 되돌이점 x_2 근처에서의 파동함수는 앞에서와 마찬가지로 에어리 함수들의 1차 결합으로 표현할 수 있다.

$$\psi_{t_2} \sim \gamma A_i(y) + \delta B_i(y)$$

이제 파동함수 ψ_{t_2} 와 영역 III 에서의 파동함수 ψ_{III} 의 연결은 $y \ll 0$ 인 지점에서 일어나므로 우리는 에어리 함수들의 점근 형태로 ψ_{t_2} 를 표현하도록 하겠다.

$$\psi_{t_2} \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}(-y)^{\frac{1}{4}}}\left[\gamma\sin\left\{\frac{2}{3}(-y)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right\} + \delta\cos\left\{\frac{2}{3}(-y)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right\}\right]$$

한편, ψ_{III} 는 $\int_{x_2}^{x} k(x)dx = \int_{x_2}^{x}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}c_2(x-x_2)}\,dx = \int_{y}^{0}(-y)^{\frac{1}{2}}dy = \frac{2}{3}(-y)^{\frac{3}{2}}$ 임을 쓰면 다음과 같이 표현된다.

$$\psi_{\mathrm{III}} \sim \frac{1}{\sqrt{k}}Fe^{i\int_{x_2}^{x}k(x)dx} \sim \frac{F}{(-y)^{\frac{1}{4}}}e^{i\left[\frac{2}{3}(-y)^{\frac{3}{2}}\right]}\,,$$

이 함수와 비교하기 위하여 ψ_{III} 를 다음과 같이 다시 쓰자.

$$\psi_{t_2} = \frac{1}{\sqrt{\pi}(-y)^{\frac{1}{4}}}\left[\frac{\gamma}{2i}\left\{e^{i\left(\frac{2}{3}(-y)^{\frac{3}{2}}+\frac{\pi}{4}\right)} - e^{-i\left(\frac{2}{3}(-y)^{\frac{3}{2}}+\frac{\pi}{4}\right)}\right\} + \frac{\delta}{2}\left\{e^{i\left(\frac{2}{3}(-y)^{\frac{3}{2}}+\frac{\pi}{4}\right)} + e^{-i\left(\frac{2}{3}(-y)^{\frac{3}{2}}+\frac{\pi}{4}\right)}\right\}\right]$$

위의 두 파동함수는 영역 III ($y \ll 0$)에서 같아져야 하므로, 두 함수를 비교하여 우리는 다음의 관계를 얻는다.

$$F \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{\gamma}{2i}e^{i\frac{\pi}{4}} + \frac{\delta}{2}e^{i\frac{\pi}{4}}\right), \quad 0 = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(-\frac{\gamma}{2i}e^{-i\frac{\pi}{4}} + \frac{\delta}{2}e^{-i\frac{\pi}{4}}\right)$$

즉,

$$\gamma = i\,\delta\,, \quad F \sim \frac{e^{i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{\pi}}\delta \qquad \text{--------} \qquad (1)$$

가 성립되어야 한다. 여기서 ~ 표시는 WKB 파동함수와 되돌이점 근처에서 구한 파동함수가 하나의 전체적인 비례상수만큼 서로 같음을 의미하며, 되돌이점 근처에서 구한 파동함수에 의하여 연결되는 WKB 파동함수들의 관계에서는 이미 앞에서 보았듯이 그 비례상수가

서로 상쇄되어 정확한 관계를 주게 된다.

이제 되돌이점 근처에서의 파동함수 ψ_{t_2} 와 영역 II 에서의 WKB 파동함수 ψ_{II}^{+} 와의 연결을 생각하여 보자. 이 영역에서는 $y \gg 0$ 이므로, 다시 상응하는 ψ_{t_2} 의 점근 표현을 쓰면 다음과 같이 된다.

$$\psi_{t_2} \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}\, y^{\frac{1}{4}}} \left\{ \frac{\gamma}{2} e^{-\frac{2}{3} y^{\frac{3}{2}}} + \delta e^{\frac{2}{3} y^{\frac{3}{2}}} \right\}$$

한편, 앞에서 구한 $\gamma = i\delta$ 의 관계는 여전히 성립한다는 점을 기억하자.

이 경우 $\kappa = \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2} c_2 (x - x_2)} \sim y^{\frac{1}{2}}$ 이므로, $\int_x^{x_2} \kappa\, dx = -\int_y^0 y^{\frac{1}{2}} dy = \frac{2}{3} y^{\frac{3}{2}}$ 인 점을 사용하여 ψ_{II}^{+} 를 다시 쓰면 다음과 같다.

$$\psi_{\mathrm{II}}^{+} \sim \frac{1}{y^{\frac{1}{4}}} \left\{ C' e^{\frac{2}{3} y^{\frac{3}{2}}} + D' e^{-\frac{2}{3} y^{\frac{3}{2}}} \right\}$$

이 두 파동함수가 같아져야 하므로 우리는 다음의 관계를 얻는다.

$$\frac{\gamma}{2\sqrt{\pi}} \sim D' , \quad \frac{\delta}{\sqrt{\pi}} \sim C' \qquad \text{--------} \quad (2)$$

앞에서 얻은 $D' = e^{K} C$, $C' = e^{-K} D$ 의 관계를 적용하면, 다시 다음 관계를 얻는다.

$$C \sim \frac{e^{-K}}{2\sqrt{\pi}} \gamma = \frac{i\, e^{-K}}{2\sqrt{\pi}} \delta , \qquad D \sim \frac{e^{K}}{\sqrt{\pi}} \delta \qquad \text{-------} \quad (3)$$

주목할 점은 (1)식과 (2)식의 결과로부터 우리는 앞에서 얻은 연결공식 외에 새로운 연결공식을 얻을 수 있다. (1)식의 결과를 적용하면 영역 III 에서의 파동함수 ψ_{III} 는

$$\psi_{\mathrm{III}} \sim \frac{1}{2\sqrt{\pi}\,\sqrt{k}} \left(\frac{\gamma}{i} + \delta\right) e^{i\left[\int_{x_2}^{x} k(x)dx + \frac{\pi}{4}\right]}$$

$$= \frac{\delta}{\sqrt{\pi}\,\sqrt{k}} \left\{ \cos\left[\int_{x_2}^{x} k(x)dx + \frac{\pi}{4}\right] + i \sin\left[\int_{x_2}^{x} k(x)dx + \frac{\pi}{4}\right] \right\} ,$$

(2)식의 결과로부터 ψ_{II}^{+} 는

$$\psi_{\mathrm{II}}^{+} \sim \frac{\delta}{\sqrt{\pi}\,\sqrt{\kappa}} \left\{ e^{\int_x^{x_2} \kappa\, dx} + \frac{i}{2} e^{-\int_x^{x_2} \kappa\, dx} \right\}$$

로 주어진다. 여기서 에어리 함수 $Ai(y)$ 의 계수 γ 는 ψ_{II}^{+} 의 계수 D' 과 $Bi(y)$ 의 계수 δ 는 C' 과 연결되므로 우리는 에어리 함수 $Ai(y)$ 와 $Bi(y)$ 를 통하여 WKB 파동함수들

이 각각 다음과 같이 연결됨을 알 수 있다.

$$\frac{1}{\sqrt{\kappa}} e^{-\int_x^{x_2} \kappa dx} \ (\text{for } x < x_2) \ \longleftrightarrow \ \frac{2}{\sqrt{k}} \sin\left[\int_{x_2}^{x} k dx + \frac{\pi}{4}\right] \ (\text{for } x > x_2) \ ,$$

$$\frac{1}{\sqrt{\kappa}} e^{\int_x^{x_2} \kappa dx} \ (\text{for } x < x_2) \ \longleftrightarrow \ \frac{1}{\sqrt{k}} \cos\left[\int_{x_2}^{x} k dx + \frac{\pi}{4}\right] \ (\text{for } x > x_2) \ .$$

첫 번째 식은 우리가 앞에서 얻은 연결공식의 하나이고, 두 번째는 새로운 연결공식이다.

다음으로 되돌이점 x_1 근처에서 파동함수들의 연결을 살펴보도록 하자. 이 경우에도 되돌이점에서 위치에너지 함수의 접선의 기울기를 c_1 으로 놓으면, 위치에너지는

$V \simeq c_1(x-x_1)+E \quad (c_1 > 0)$ 으로 쓸 수 있으므로, $y \equiv (\frac{2m}{\hbar^2}c_1)^{\frac{1}{3}}(x-x_1)$ 으로 놓으면 슈뢰딩거 방정식은 동일하게 에어리의 방정식으로 주어진다.

$$\frac{d^2\psi_{t_1}}{dy^2} - y\psi_{t_1} = 0$$

그러므로 되돌이점 근처에서의 파동함수 ψ_{t_1} 는 다음과 같이 에어리 함수들의 1차 결합으로 표현할 수 있다.

$$\psi_{t_1} \sim \alpha A_i(y) + \beta B_i(y)$$

이제 앞에서처럼 ψ_{t_1} 과 영역 II 에서의 파동함수 ψ_{II}^- 를 연결하여 보자. 이 두 함수가 연결되는 영역에서는 $y \gg 0$ 이 되므로 이에 따른 에어리 함수들의 점근 표현을 사용하면 다음과 같다.

$$\psi_{t_1} \sim \frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}\, y^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{2}{3}y^{\frac{3}{2}}} + \frac{\beta}{\sqrt{\pi}\, y^{\frac{1}{4}}} e^{\frac{2}{3}y^{\frac{3}{2}}}$$

한편, 파동함수 ψ_{II}^- 는 이 경우 $\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}c_1(x-x_1)} \sim y^{\frac{1}{2}}$ 로 주어지고,

$\int_{x_1}^{x} \kappa dx = \int_0^y y^{\frac{1}{2}} dy = \frac{2}{3} y^{\frac{3}{2}}$ 임을 사용하면 다음과 같이 쓸 수 있으므로,

$$\psi_{\text{II}}^- \sim \frac{1}{\sqrt{\kappa}}\left[C e^{\int_{x_1}^{x}\kappa dx} + D e^{-\int_{x_1}^{x}\kappa dx}\right] \sim \frac{1}{y^{\frac{1}{4}}}\left\{C e^{\frac{2}{3}y^{\frac{3}{2}}} + D e^{-\frac{2}{3}y^{\frac{3}{2}}}\right\} \ ,$$

파동함수 ψ_{t_1} 과 같아지려면 다음의 관계가 성립하여야 한다.

$$\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}} \sim D\,, \quad \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} \sim C \qquad \text{-------} \ (4)$$

앞에서 얻은 $C \sim \dfrac{i\,e^{-K}}{2\sqrt{\pi}}\delta$, $D \sim \dfrac{e^{K}}{\sqrt{\pi}}\delta$ 의 관계를 적용하면 다시 다음의 관계로 쓸 수 있다.

$$\alpha \sim 2\,e^{K}\delta\ , \quad \beta \sim \frac{i}{2}e^{-K}\delta \qquad \text{-------} \ (5)$$

마지막으로 ψ_{t_1} 과 영역 I 에서의 파동함수 ψ_I 를 연결하여 보자.

이 경우는 $y \ll 0$ 인 경우에 해당하므로, 이에 해당하는 ψ_{t_1} 의 점근 표현을 쓰면 다음과 같다.

$$\psi_{t_1} \sim \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}(-y)^{\frac{1}{4}}}\sin\left\{\frac{2}{3}(-y)^{\frac{3}{2}}+\frac{\pi}{4}\right\}+\frac{\beta}{\sqrt{\pi}(-y)^{-\frac{1}{4}}}\cos\left\{\frac{2}{3}(-y)^{\frac{3}{2}}+\frac{\pi}{4}\right\}$$

한편, 이 경우 $k=\sqrt{-\dfrac{2m}{\hbar^2}c_1(x-x_1)} \sim (-y)^{\frac{1}{2}}$ 으로 주어지고,

$\displaystyle\int_x^{x_1} k\,dx = \int_y^0 (-y)^{\frac{1}{2}}dy = \frac{2}{3}(-y)^{\frac{3}{2}}$ 임을 사용하면, 파동함수 ψ_I 은 다음과 같이 주어진다.

$$\psi_I \sim \frac{1}{\sqrt{k}}\left[A\,e^{i\int_x^{x_1}kdx}+B\,e^{-i\int_x^{x_1}kdx}\right] \sim \frac{1}{(-y)^{\frac{1}{4}}}\left\{A\,e^{i\frac{2}{3}(-y)^{\frac{3}{2}}}+B\,e^{-i\frac{2}{3}(-y)^{\frac{3}{2}}}\right\}$$

위 두 함수를 비교하기 위하여 ψ_{t_1} 을 다시 다음과 같이 쓰면,

$$\begin{aligned}
\psi_{t_1} &\sim \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}(-y)^{\frac{1}{4}}}\left\{\frac{1}{2i}\left(e^{i(\frac{2}{3}(-y)^{\frac{3}{2}}+\frac{\pi}{4})}-e^{-i(\frac{2}{3}(-y)^{\frac{3}{2}}+\frac{\pi}{4})}\right)\right\} \\
&\quad +\frac{\beta}{\sqrt{\pi}(-y)^{\frac{1}{4}}}\left\{\frac{1}{2}\left(e^{i(\frac{2}{3}(-y)^{\frac{3}{2}}+\frac{\pi}{4})}+e^{-i(\frac{2}{3}(-y)^{\frac{3}{2}}+\frac{\pi}{4})}\right)\right\} \\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi}(-y)^{\frac{1}{4}}}\left\{(\frac{\alpha}{2i}+\frac{\beta}{2})e^{i(\frac{2}{3}(-y)^{\frac{3}{2}}+\frac{\pi}{4})}+(-\frac{\alpha}{2i}+\frac{\beta}{2})e^{-i(\frac{2}{3}(-y)^{\frac{3}{2}}+\frac{\pi}{4})}\right\}
\end{aligned}$$

우리는 다음의 관계가 성립되어야 함을 알 수 있다.

$$A \sim \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\left(\frac{\alpha}{i}+\beta\right)e^{i\frac{\pi}{4}},\ \ B \sim \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\left(-\frac{\alpha}{i}+\beta\right)e^{-i\frac{\pi}{4}} \qquad \text{-------} \ (6)$$

앞에서 얻은 관계 $\alpha \sim 2\,e^{K}\delta$, $\beta \sim \dfrac{i}{2}e^{-K}\delta$ 를 사용하면, 이는 다시 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$A \sim \frac{i}{\sqrt{\pi}}\ e^{i\frac{\pi}{4}}\left(-e^{K}+\frac{1}{4}e^{-K}\right)\delta\ , \quad B \sim \frac{i}{\sqrt{\pi}}\ e^{-i\frac{\pi}{4}}\left(e^{K}+\frac{1}{4}e^{-K}\right)\delta \qquad \text{-------} \ (7)$$

여기서도 앞에서와 마찬가지로 (4)식과 (6)식의 결과로부터 새로운 연결공식을 얻는다.
(4)식으로부터, 영역 II 에서의 파동함수 ψ_{II}^{-} 는

$$\psi_{\text{II}}^{-} \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}\sqrt{\kappa}}\left\{\beta\, e^{\int_{x_1}^{x}\kappa\, dx} + \frac{\alpha}{2}\ e^{-\int_{x_1}^{x}\kappa\, dx}\right\}\ ,$$

(6)식으로부터 영역 I 에서의 파동함수 ψ_{I} 는

$$\begin{aligned}\psi_{\text{I}} &\sim \frac{1}{2\sqrt{\pi}\sqrt{k}}\left\{(\frac{\alpha}{i}+\beta)\, e^{i\left[\int_{x}^{x_1}k(x)dx+\frac{\pi}{4}\right]} + (-\frac{\alpha}{i}+\beta)\, e^{-i\left[\int_{x}^{x_1}k(x)dx+\frac{\pi}{4}\right]}\right\}\\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}\sqrt{k}}\left\{\alpha\sin\left[\int_{x}^{x_1}k(x)dx+\frac{\pi}{4}\right]+\beta\cos\left[\int_{x}^{x_1}k(x)dx+\frac{\pi}{4}\right]\right\}\end{aligned}$$

으로 주어지므로 에어리 함수 $Ai(y)$(계수 α)와 $Bi(y)$(계수 β)를 통하여 WKB 파동함수들이 각각 다음과 같이 연결됨을 알 수 있다.

$$\frac{2}{\sqrt{k}}\sin\left[\int_{x}^{x_1}k\,dx+\frac{\pi}{4}\right]\ (\text{for } x < x_1) \longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{\kappa}}e^{-\int_{x_1}^{x}\kappa\, dx}\quad (\text{for } x > x_1)\ ,$$

$$\frac{1}{\sqrt{k}}\cos\left[\int_{x}^{x_1}k\,dx+\frac{\pi}{4}\right]\ (\text{for } x < x_1) \longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{\kappa}}\ e^{\int_{x_1}^{x}\kappa\, dx}\quad (\text{for } x > x_1)\ .$$

첫 번째 식은 앞에서 얻은 연결공식이고, 두 번째는 새로운 연결공식이다.

이제 맨 처음에 얻은 (1)식의 $F \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{i\frac{\pi}{4}}\delta$ 의 관계를 (7)식에 적용하면 우리는 최종적으로 다음의 관계를 얻는다.

$$A = i\left(-e^{K}+\frac{1}{4}e^{-K}\right)F\ , \quad B = \left(e^{K}+\frac{1}{4}e^{-K}\right)F \qquad \text{-------} \ (8)$$

여기서 주목할 점은 파동함수 ψ_I 에서 입사파 부분의 계수는 B 로 주어진다는 점이다. 이는 위에서 파동함수 ψ_I 의 B 계수 부분이 $B\, e^{-i\int_{x}^{x_1}k\,dx} \sim B\, e^{-i\frac{3}{2}(-y)^{\frac{3}{2}}}$ 으로 표현되었는데, 여기서 $k \sim (-y)^{\frac{1}{2}}$ 이고 $y \sim x$ 이므로, $-i(-y)^{\frac{3}{2}} \sim ikx$ 로 표현될 수 있으므로

입사파에 해당함을 보여준다. 그러므로 이제 투과계수는 다음과 같이 주어진다.

$$T = \frac{J_{투과}}{J_{입사}} = \left| \frac{F}{B} \right|^2 = \frac{1}{\left(e^K + \frac{1}{4}e^{-K}\right)^2}$$

여기서 $K \equiv \int_{x_1}^{x_2} \kappa\, dx = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]}\, dx$ 이다.

이 공식에서 $K \gg 1$ 인 경우를 생각하면

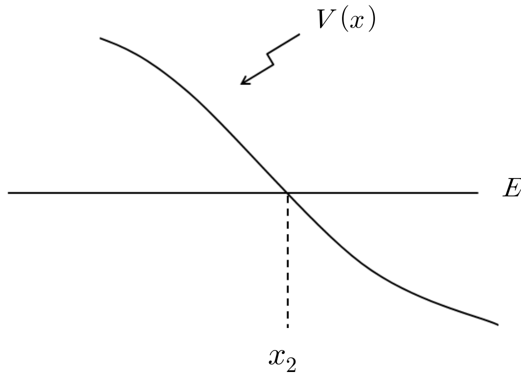
$$T \simeq e^{-2K} = \exp\left[-2\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E)}\, dx\right]$$

로 되어 1절에서 얻은 결과와 같아짐을 보여준다.

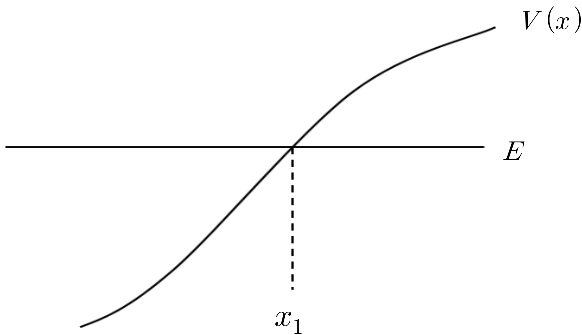
최종적으로 앞에서 얻은 연결공식을 정리하면 다음과 같다.

$$\frac{1}{\sqrt{\kappa}} e^{-\int_x^{x_2} \kappa dx} \ (\text{for } x < x_2) \longleftrightarrow \frac{2}{\sqrt{k}} \sin\left[\int_{x_2}^{x} k dx + \frac{\pi}{4}\right] \ (\text{for } x > x_2),$$

$$\frac{1}{\sqrt{\kappa}} e^{\int_x^{x_2} \kappa dx} \ (\text{for } x < x_2) \longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{k}} \cos\left[\int_{x_2}^{x} k dx + \frac{\pi}{4}\right] \ (\text{for } x > x_2).$$



위 두 연결공식이 성립하는 경우



아래 두 연결공식이 성립하는 경우

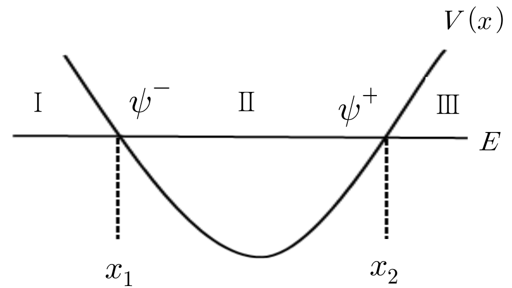
$$\frac{2}{\sqrt{k}}\sin\left[\int_x^{x_1} k\,dx+\frac{\pi}{4}\right]\ (\text{for } x<x_1) \longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{\kappa}}e^{-\int_{x_1}^{x}\kappa\,dx}\ (\text{for } x>x_1)\ ,$$

$$\frac{1}{\sqrt{k}}\cos\left[\int_x^{x_1} k\,dx+\frac{\pi}{4}\right]\ (\text{for } x<x_1) \longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{\kappa}}e^{\int_{x_1}^{x}\kappa\,dx}\ (\text{for } x>x_1)\ .$$

참고로 흔히 인용되는 연결공식에서는 sin, cos 함수의 변수를 $\int k\,dx+\frac{\pi}{4}$ 의 형태가 아닌 $\int k\,dx-\frac{\pi}{4}$ 의 형태로 표시하였는데, 이는 아래의 관계식을 써서 곧 얻을 수 있다.

$$\sin(\theta+\frac{\pi}{4})=\cos(\theta-\frac{\pi}{4}),\quad \cos(\theta+\frac{\pi}{4})=-\sin(\theta-\frac{\pi}{4})\ .$$

6.5 속박상태에의 적용 (Applications to bound states)



이제 옆의 그림과 같은 속박상태의 경우에 WKB 어림을 적용해보자. 앞에서 우리는 영역 II에서 x_1 근처에서는 WKB 파동함수 ψ^- 가

$\sim\frac{2}{\sqrt{k}}\sin\left[\int_{x_1}^{x} k\,dx+\frac{\pi}{4}\right]$ 이나

$\sim\frac{1}{\sqrt{k}}\cos\left[\int_{x_1}^{x} k\,dx+\frac{\pi}{4}\right]$ 으로 주어지고, x_2 근처에서는 WKB 파동함수 ψ^+ 가

$\sim\frac{2}{\sqrt{k}}\sin\left[\int_x^{x_2} k\,dx+\frac{\pi}{4}\right]$ 이나 $\sim\frac{1}{\sqrt{k}}\cos\left[\int_x^{x_1} k\,dx+\frac{\pi}{4}\right]$ 으로 주어짐을 보았다.

하지만 영역 II 에서의 두 파동함수는 서로 일치하여야 하므로 sin 함수나 cos 함수로 주어진 각각의 경우에 하나의 표현은 다른 표현으로 표시될 수 있어야 한다.

즉, 예컨대 sin 함수로 주어진 경우를 가정하면 ψ^- 의 $\sin\left[\int_{x_1}^{x} k\,dx+\frac{\pi}{4}\right]$ 는 ψ^+ 의 $\sin\left[\int_x^{x_2} k\,dx+\frac{\pi}{4}\right]$ 로 표현 가능하여야 한다. 여기서, ψ^- 를 다시 쓰면 다음과 같다.

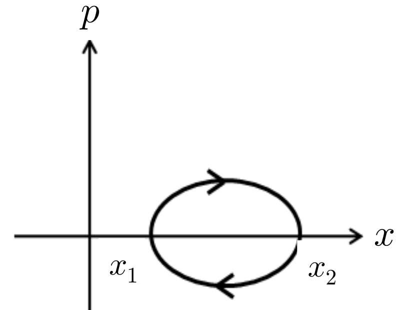
$$\sin\left[\int_{x_1}^{x} k\,dx+\frac{\pi}{4}\right]=\sin\left[\int_{x_1}^{x_2} k\,dx-(\int_x^{x_2} k\,dx+\frac{\pi}{4})+\frac{\pi}{2}\right]$$

$$=\sin\left(\int_{x_1}^{x_2} k\,dx+\frac{\pi}{2}\right)\cos\left(\int_x^{x_2} k\,dx+\frac{\pi}{4}\right)-\cos\left(\int_{x_1}^{x_2} k\,dx+\frac{\pi}{2}\right)\sin\left(\int_x^{x_2} k\,dx+\frac{\pi}{4}\right)$$

그러므로 ψ^- 이 ψ^+ 로 표현되려면, $\sin\left(\int_{x_1}^{x_2} k\,dx + \frac{\pi}{2}\right) = 0$ 의 조건이 만족되어야 한다. 즉, $\int_{x_1}^{x_2} k\,dx + \frac{\pi}{2} = n\pi$, $n = 1,2,3,\ldots$ 이 만족되어야 한다. 여기서 n 이 1 보다 큰 이유는 $\int_{x_1}^{x_2} k\,dx$ 값이 영보다 크기 때문이다. 이제 k 를 운동량 p 로 표현하면 위 조건식은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\int_{x_1}^{x_2} p\,dx = (n - \frac{1}{2})\hbar\pi = (n - \frac{1}{2})\frac{h}{2}, \quad n = 1,2,3,\ldots \qquad \text{-----}\ (1)$$

여기서 $p = \sqrt{2m(E - V(x))}$ 이다.
여기서 x, p 위상 공간에서의 궤도를 생각하여 닫힌 경로적분($x_1 \to x_2 \to x_1$)을 생각하면 다음의 조건이 만족되어야 한다.

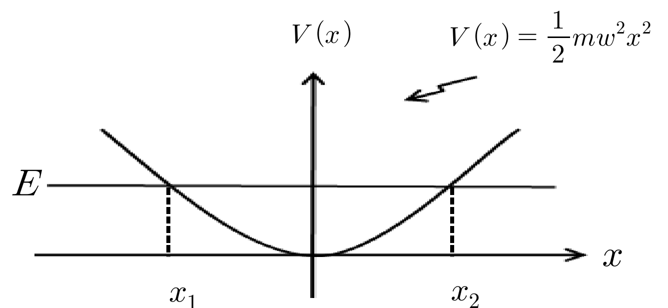


$$\oint p\,dx = (n - \frac{1}{2})h, \quad n = 1,2,3,\ldots \qquad \text{-----}\ (2)$$

이제 이 조건식을 1차원 단순 조화 떨개의 경우에 적용해 보자. 이 경우 위치에너지는 $V(x) = \frac{1}{2}mw^2x^2$ 으로 주어지므로, 다음 조건식이 만족되어야 한다.

$$\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(E - \frac{1}{2}mw^2x^2)}\,dx = (n + \frac{1}{2})\hbar\pi, \quad n = 0,1,2,\ldots \qquad \text{-----}\ (3)$$

위의 (3)식은 적분변수 x 를 다음과 같이 $\sin\theta \equiv \sqrt{\frac{mw^2}{2E}}\,x$ 로 치환하자. 두 되돌이 점 $x_1 = -x_0$ 과 $x_2 = x_0$ $(x_0 > 0)$ 에서의 에너지는 동일한 $E = \frac{1}{2}mw^2x_0^2$ 이므로 x_1 에서는 $\sin\theta = -1$, x_2 에서는 $\sin\theta = 1$ 이 되어



적분의 하한값과 상한값은 각각 $\theta_1 = -\frac{\pi}{2}$, $\theta_2 = \frac{\pi}{2}$ 가 된다.
그러므로 위 조건식은 다음과 같이 된다.

$$\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} (\frac{2E}{w})\cos^2\theta\,d\theta = (n + \frac{1}{2})\frac{h}{2}, \quad n = 0,1,2,\ldots$$

위 조건식으로부터 에너지는 다음과 같이 주어짐을 쉽게 알 수 있다.

$$E = (n + \frac{1}{2})\hbar w\,, \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

이는 앞에서 1차원 단순 조화 떨개를 정확히 풀어서 구한 에너지 값들과 정확하게 일치함을 보여준다.

WKB 어림은 위치에너지가 드브로이 파장 정도의 거리에서는 아주 천천히 변한다는 가정을 하고 있는데, 1차원 상자의 경우에 적용하면 어떻게 될까?
1차원 상자 내에서는 $p = \sqrt{2mE}$ 로 주어지므로, 1차원 상자의 길이가 a 라고 하면, (1)식에서 다음의 결과를 얻는다.

$$pa = (n - \frac{1}{2})\hbar\pi\,, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

즉, $E = \frac{p^2}{2m} = \frac{(n - \frac{1}{2})^2 \hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$, $n = 1, 2, 3, \ldots$ 이 되어 $n \gg 1$ 인 경우에는 정확한 해와 접근하게 되지만, 그렇지 않은 경우에는 상당히 다른 값을 주는 것을 볼 수 있다.
이는 $n \gg 1$ 인 경우에는 상자의 양 벽들이 다수의 드브로이 파장만큼 떨어져 있게 되어 WKB 가정을 만족하지 않는 부분의 기여가 작아 대체로 정확한 해의 결과에 근접하지만, 그렇지 않은 경우에는 WKB 가정이 성립되지 않는 부분이 커서 WKB 어림과 정확한 해의 결과가 서로 다르게 됨을 보여준다.
